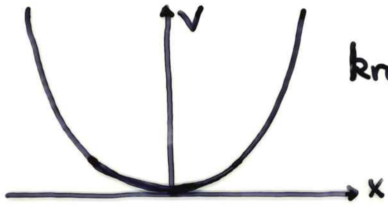
KAP. 6: SMÅ OSCILLASJONER

Anvendelser:

- vibrasjoner i molekyler
- gittervibrasjoner i faste stoffer
- vibrasjoner i mekaniske systemer
- svingninger i koblede elektriske kretser
- akustikk

Kort rekapitulering av endimensjonal harmonisk oscillator:

$V(x) = \frac{1}{2} k x^2$



krumning $= \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = k$

$F = m\ddot{x}$, $F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx$

$\Rightarrow m\ddot{x} + kx = 0 \Rightarrow x(t) = \mathrm{Re}\{A e^{-i\omega_0 t}\}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$

⟩: harmonisk svingning med vinkelfrekvens $\omega_0 = \sqrt{k/m}$

Med dempning (friksjon): $F_f = -\lambda \dot{x}$

$$\Rightarrow m\ddot{x} + \lambda\dot{x} + kx = 0 \Rightarrow x(t) = \mathrm{Re}\{A e^{-i(\omega_0 - i\frac{\lambda}{m})t}\}$$
$$= e^{-\frac{\lambda}{m}t}\,\mathrm{Re}\{A e^{-i\omega_0 t}\}$$

⟩: dempet harmonisk svingning

—— · ——

Resten av kapitlet: Generalisering av enkel harm. osc. til system av koblede lineære harm. osc.

Anta <u>konservativt</u> system, dvs V kun avhengig av posisjoner. Anta dessuten at evt. føringer ikke er tidsavhengige.

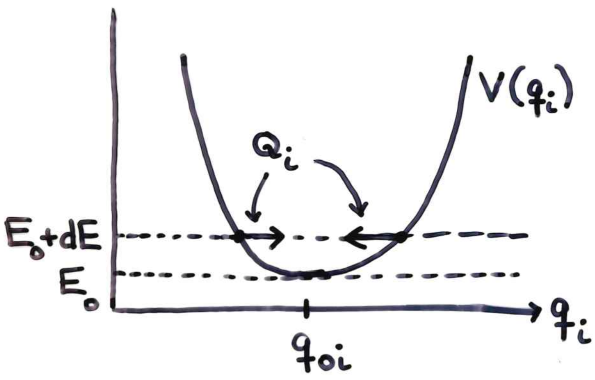
Utg.punkt er som vanlig system med N "partikler" og $3N$ frihetsgrader. Med k føringer reduseres antall frihetsgrader til $n = 3N - k$. Antar at vi har transformert fra $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N)$ til n generaliserte uavhengige koordinater $(q_1, q_2, \cdots, q_n)$.
[Se kap. 1 !]

Systemet i <u>likevekt</u> når samtlige generaliserte krefter forsvinner:

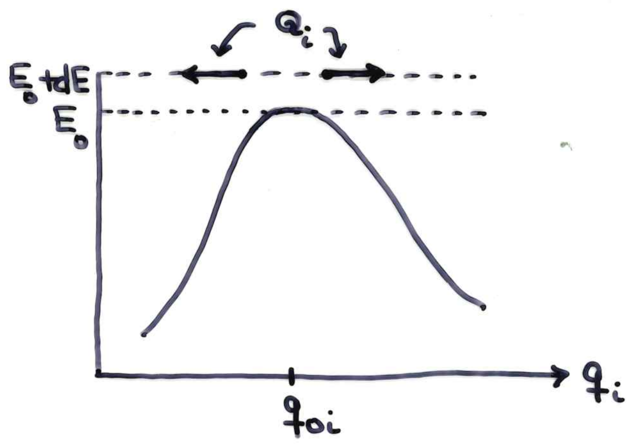
$$Q_i = -\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 = 0$$

$\supset$: ekstremalverdi av V i likevektskonfigurasjonen $(q_{01}, q_{02}, \cdots, q_{0n})$.

<u>Stabil</u> likevekt hvis liten forstyrrelse fra likevekt medfører liten bundet bevegelse omkring likevektsstillingen.



stabil likevekt



ustabil likevekt

<u>Ustabil</u> likevekt hvis liten forstyrrelse fra likevekt gir ubundet bevegelse.

Vi skal kun se på små utsving fra stabil likevekt

$\Rightarrow \quad q_i = q_{0i} + \eta_i \quad ; \quad \eta_i = $ utsving fra likevekt

Velger η_i som nye generaliserte koordinater.

Taylorutvikling av V omkring q_{0i} :

$$V(q_1, q_2, \cdots, q_n) = V(q_{01}, q_{02}, \cdots, q_{0n}) + \left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 \eta_i + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right)_0 \eta_i \eta_j + \ldots\ldots$$

(Her er $\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 \equiv \left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_{q_1 = q_{01},\, q_2 = q_{02} \cdots q_n = q_{0n}}$ etc., og vi bruker her igjen summekonv. for repeterte indekser: $\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 \eta_i \equiv \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 \eta_i$)

Pga. likevektsbetingelsen (s.92), $\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right)_0 = 0$, faller ledd lineære i η bort.
Nullnivå for V kan velges vilkårlig, f.eks. $V(q_{01}, q_{02}, \cdots, q_{0n}) = 0$, og dermed faller også konstantleddet bort.

$$\Rightarrow \quad V = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right)_0 \eta_i \eta_j \equiv \frac{1}{2} V_{ij} \eta_i \eta_j$$

Ser at $V_{ij} = V_{ji}$.

Kinetisk energi T kan skrives som (homogen) kvadratisk funksjon av hastighetene :

$$T = \frac{1}{2} m_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j = \frac{1}{2} m_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$$

Her er generelt koeffisientene m_{ij} funksjoner av q_k :

$$m_{ij}(q_1 \cdots q_n) = m_{ij}(q_{01} \cdots q_{0n}) + \left(\frac{\partial m_{ij}}{\partial q_k}\right)_0 \eta_k + \ldots\ldots$$

[Jfr. eks. s.14: $T(r, \theta, \dot{r}, \dot{\theta}) = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + \frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2 \Rightarrow m_{11} = m,\ m_{22} = m r^2,$
$m_{12} = m_{21} = 0$]

Uttrykket for T, $\frac{1}{2} m_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j$, allerede kvadratisk i $\dot{\eta}$

$\Rightarrow$ beholder kun konstantleddet i m_{ij} til ledende orden

$\Rightarrow$
$$T = \frac{1}{2} T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j \quad ; \quad T_{ij} \equiv m_{ij}(q_{01} \cdots q_{0n})$$

Symmetri: $T_{ij} = T_{ji}$ (Som regel diagonal, $T_{ij} = T_i \delta_{ij}$)

Lagrangefunksjon:

$$L(\eta, \dot{\eta}) = T - V = \frac{1}{2}\left(T_{ij} \dot{\eta}_i \dot{\eta}_j - V_{ij} \eta_i \eta_j\right)$$

Bevegelsesligninger (ɔ: Lagranges ligninger):

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} - \frac{\partial L}{\partial \eta_i} = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

La oss se på lign. for en bestemt i. Bruker da f.eks. ℓ og j som summeindeks i uttr. for L: $L = \frac{1}{2}\left(T_{\ell j} \dot{\eta}_\ell \dot{\eta}_j - V_{\ell j} \eta_\ell \eta_j\right)$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} = \frac{1}{2} T_{\ell j} \frac{\partial}{\partial \dot{\eta}_i}\left(\dot{\eta}_\ell \dot{\eta}_j\right) = \frac{1}{2} T_{\ell j}\left(\delta_{i\ell} \dot{\eta}_j + \dot{\eta}_\ell \delta_{ij}\right)$$

$$= \frac{1}{2} T_{ij} \dot{\eta}_j + \frac{1}{2} T_{\ell i} \dot{\eta}_\ell$$

$$= \frac{1}{2} T_{ij} \dot{\eta}_j + \frac{1}{2} T_{i\ell} \dot{\eta}_\ell \qquad (T_{\ell i} = T_{i\ell})$$

$$= \frac{1}{2} T_{ij} \dot{\eta}_j + \frac{1}{2} T_{ij} \dot{\eta}_j \qquad (\text{omdøpt summeindeks: } \ell \to j)$$

$$= T_{ij} \dot{\eta}_j$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} = T_{ij} \frac{d}{dt} \dot{\eta}_j = T_{ij} \ddot{\eta}_j$$

Helt tilsvarende får vi:

$$\frac{\partial L}{\partial \eta_i} = - V_{ij} \eta_j$$

$$\Rightarrow \quad T_{ij}\ddot{\eta}_j + V_{ij}\eta_j = 0 \quad ; \quad i = 1,2,\ldots,n$$

$\supset$: et sett av n koblede lineære 2.ordens diff.ligninger.

- Løsningen beskriver systemets bevegelse nær likevekt
- Får $2n$ integrasjonskonstanter som kan fastlegges med kunnskap om $2n$ initialbetingelser, f.eks. η_i og $\dot{\eta}_i$ ved $t=0$
- Lign. har samme <u>form</u> som endim. harm. oscillator

Må være rimelig å gjøre følgende ansats:

$$\eta_i(t) = A_i e^{-i\omega t}$$

Her er A_i komplekse amplituder, og det er underforstått at det er $\mathrm{Re}\,\eta_i$ som svarer til den virkelige bevegelsen.
Sett inn i bevegelsesligningene:

$$V_{ij}A_j - \omega^2 T_{ij}A_j = 0 \quad ; \quad n \text{ homogene lign. for } A_i$$

Løsningsbetingelse (karakteristisk ligning ; sekulær ligning):

$$\det(\mathbb{V} - \omega^2 \mathbb{T}) = 0$$

$$\supset: \quad \begin{vmatrix} V_{11}-\omega^2 T_{11} & V_{12}-\omega^2 T_{12} & \cdots\cdots & V_{1n}-\omega^2 T_{1n} \\ V_{21}-\omega^2 T_{21} & \cdots\cdots & & \\ \vdots & & & \\ V_{n1}-\omega^2 T_{n1} & \cdots\cdots & & V_{nn}-\omega^2 T_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

Dette er en n'te grads ligning for ω^2, med generelt n forskjellige røtter ω_α^2 ; $\alpha = 1,2,\ldots,n$. ω_α kalles systemets <u>egenfrekvenser</u>.

Av fysiske grunner : $\omega_\alpha^2 \geq 0$ og ω_α^2 reell

Hvis ikke, blir $\omega_\alpha = \omega' + i\omega''$, og $e^{-i\omega_\alpha t} = e^{-i\omega' t} e^{\omega'' t}$

$\Rightarrow$ eksponentiell økning ($\omega''>0$) eller dempning ($\omega''<0$) av utsvingene; ikke forenlig med energibevarelse!

Anta nå at vi har bestemt egenfrekvensene ω_α. Neste spørsmål blir da: Hvordan ser de tilhørende egensvingningene ut? M.a.o., hvilke deler av systemet beveger seg, og hvor mye beveger de seg, i svingemode α?

Må bestemme utsvingsamplitudene $A_{i\alpha}$ for å kunne svare på det.

$A_{i\alpha}$ = amplituden til utsvinget langs gen. koord. q_i i mode α

Bestemmes av ligningene

$$(V_{ij} - \omega_\alpha^2 T_{ij}) A_{j\alpha} = 0$$

For gitt ω_α er dette n ligninger som bestemmer n-1 av komp. i α "amplitudevektoren"

$$\vec{A}_\alpha = \begin{pmatrix} A_{1\alpha} \\ A_{2\alpha} \\ \vdots \\ A_{n\alpha} \end{pmatrix}$$

Står igjen med én ubestemt komponent, f.eks. $A_{1\alpha}$, for hver α. Da $A_{1\alpha}$ generelt er kompleks, er det dermed 2 ubestemte størrelser for hver α (absoluttverdi og fase for $A_{1\alpha}$), og ialt 2n ubestemte størrelser – OK! Som nevnt før, trengs 2n initialbetingelser for å bestemme løsningen fullstendig.

Anta nå at alle egenfrekvensene ω_α er forskjellige. Skal da vise at $A_{i\alpha}$ er proporsjonal med "minoren" $\Delta_{i\alpha}$ til determinanten $|\mathbb{V} - \omega_\alpha^2 \mathbb{T}|$. "Minoren" (evt. kofaktoren) $\Delta_{i\alpha}$ er underdeterminanten som framkommer ved å fjerne rekke nr. i og kolonne nr. α fra den determ. vi startet med. Fortegnet til $\Delta_{i\alpha}$ er gitt ved $(-1)^{i+\alpha}$.

"Bevis" for at $A_{i\alpha} \propto \Delta_{i\alpha}$:

Ser på tilfellet med $n=3$ og ligningen for $\alpha=1$ og $i=1$:

$$\sum_{j=1}^{n} (V_{ij} - \omega_\alpha^2 T_{ij}) A_{j\alpha} = 0$$

$$\Rightarrow (V_{11} - \omega_1^2 T_{11}) A_{11} + (V_{12} - \omega_1^2 T_{12}) A_{21} + (V_{13} - \omega_1^2 T_{13}) A_{31} = 0$$

Dette uttrykket sammenligner vi med $|\mathbb{V} - \omega_\alpha^2 \mathbb{T}| = 0$ når vi setter $\alpha = 1$ og utvikler determinanten etter 1. kolonne:

$$(V_{11} - \omega_1^2 T_{11}) \Delta_{11} + (V_{21} - \omega_1^2 T_{21}) \Delta_{21} + (V_{31} - \omega_1^2 T_{31}) \Delta_{31} = 0$$

Da $\mathbb{V}$ og $\mathbb{T}$ begge er symmetriske, kan vi bytte om indekser i V_{ij} og T_{ij} i lign. med A-er. Hvis vi deretter skriver

$$A_{i\alpha} = C_\alpha \Delta_{i\alpha}$$

(der C_α er en kompleks proporsjonalitetskonstant) får vi:

$$(V_{11} - \omega_1^2 T_{11}) C_1 \Delta_{11} + (V_{21} - \omega_1^2 T_{21}) C_1 \Delta_{21} + (V_{31} - \omega_1^2 T_{31}) C_1 \Delta_{31} = 0$$

som er nettopp den karakteristiske ligningen. QED!

Vi hadde (fra s. 95) $\eta_i = A_i e^{-i\omega t}$. Har nå funnet at systemet kan oscillere med egenfrekvensene ω_α. Utsvinget langs gen. koord. q_i er da:

$$\eta_{i\alpha} = A_{i\alpha} e^{-i\omega_\alpha t} = C_\alpha \Delta_{i\alpha} e^{-i\omega_\alpha t}$$

Generell løsning for den virkelige bevegelsen blir dermed:

$$\mathrm{Re}\, \eta_i(t) = \mathrm{Re} \sum_{\alpha=1}^{n} \eta_{i\alpha}(t) = \mathrm{Re} \sum_{\alpha=1}^{n} C_\alpha \Delta_{i\alpha} e^{-i\omega_\alpha t}$$

): tidsvariasjonen av η_i er en superposisjon av n harmoniske svingninger med vilkårlige faser og amplituder men fikserte frekvenser

Skriver løsningen på formen

$$\mathrm{Re}\, \eta_i(t) = \sum_{\alpha=1}^{n} \Delta_{i\alpha} \Theta_\alpha(t) \quad ; \quad \Theta_\alpha(t) = \mathrm{Re}\left[C_\alpha e^{-i\omega_\alpha t}\right]$$

Har her innført nye uavhengige koordinater Θ_α. Vi skal se at beveg. lign. for Θ_α <u>ikke</u> er koblede:

$$\ddot{\Theta}_\alpha + \omega_\alpha^2 \Theta_\alpha = 0 \quad ; \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

Kaller Θ_α for systemets <u>normalkoordinater</u>. Systemet oscillerer i <u>normalmode</u> α med egenfrekvens ω_α.

La oss sette inn $\mathrm{Re}\,\eta_i(t) = \sum_{\alpha=1}^{n} \Delta_{i\alpha}\,\Theta_\alpha(t)$ i uttrykkene for kinetisk energi T og potensiell energi V:

[Når vi her har tillatt η_i å være kompleks må vi erstatte η_i, η_j, $\dot\eta_i$ og $\dot\eta_j$ med $\mathrm{Re}\,\eta_i$, $\mathrm{Re}\,\eta_j$, $\mathrm{Re}\,\dot\eta_i$ og $\mathrm{Re}\,\dot\eta_j$ i uttr. for T og V.]

$$T = \tfrac{1}{2} T_{ij}\,\mathrm{Re}\,\dot\eta_i\,\mathrm{Re}\,\dot\eta_j$$

$$= \tfrac{1}{2} T_{ij}\,\Delta_{i\alpha}\,\dot\Theta_\alpha\,\Delta_{j\beta}\,\dot\Theta_\beta \qquad \left(\text{summekonv.} \Rightarrow \sum_{ij\alpha\beta} \text{ her!}\right)$$

$$V = \tfrac{1}{2} V_{ij}\,\mathrm{Re}\,\eta_i\,\mathrm{Re}\,\eta_j$$

$$= \tfrac{1}{2} V_{ij}\,\Delta_{i\alpha}\,\Theta_\alpha\,\Delta_{j\beta}\,\Theta_\beta \qquad (\text{——— '' ———})$$

Her kan vi i første omgang skrive om uttr. for V ved å gå tilbake til ligningene s. 96:

$$V_{ij} A_{j\alpha} = \omega_\alpha^2\, T_{ij} A_{j\alpha} \qquad [\text{sum over } j\,!]$$

$$\Rightarrow V_{ij}\, C_\alpha \Delta_{j\alpha} = \omega_\alpha^2\, T_{ij}\, C_\alpha \Delta_{j\alpha} \qquad [\text{NB: Ikke sum over } \alpha \text{ her!!}]$$

$$\Rightarrow V_{ij}\,\Delta_{j\alpha} = \omega_\alpha^2\, T_{ij}\,\Delta_{j\alpha} \qquad [\text{——— '' ———}]$$

$$\Rightarrow V = \tfrac{1}{2} \underbrace{V_{ij}\,\Delta_{j\beta}}_{\omega_\beta^2 T_{ij}\Delta_{j\beta}}\,\Delta_{i\alpha}\,\Theta_\alpha\,\Theta_\beta \qquad [\text{sum over alle fire her!}]$$

$$= \tfrac{1}{2}\,\omega_\beta^2\, T_{ij}\,\Delta_{j\beta}\,\Delta_{i\alpha}\,\Theta_\alpha\,\Theta_\beta \qquad [\text{——— '' ———}]$$

$$= \tfrac{1}{2}\,\omega_\beta^2\, T_{ij}\,\Delta_{i\alpha}\,\Delta_{j\beta}\,\Theta_\alpha\,\Theta_\beta \qquad [\text{——— '' ———}]$$

mens T altså er

$$T = \tfrac{1}{2} T_{ij}\,\Delta_{i\alpha}\,\Delta_{j\beta}\,\dot\Theta_\alpha\,\dot\Theta_\beta \qquad [\text{——— '' ———}]$$

For å komme videre, må vi se hva vi kan gjøre med faktoren

$$\sum_{i,j=1}^{n} T_{ij} \Delta_{i\alpha} \Delta_{j\beta}$$

som opptrer i både T og V. La oss nok en gang gå tilbake til lign. s. 96:

$$\sum_{j=1}^{n} (V_{ij} - \omega_\alpha^2 T_{ij}) A_{j\alpha} = 0$$

Bruker igjen $A_{j\alpha} = C_\alpha \Delta_{j\alpha}$ og skriver denne lign. for α og β:

$$\sum_j V_{ij} \Delta_{j\alpha} = \omega_\alpha^2 \sum_j T_{ij} \Delta_{j\alpha} \qquad (1)$$

$$\sum_j V_{ij} \Delta_{j\beta} = \omega_\beta^2 \sum_j T_{ij} \Delta_{j\beta} \qquad (2)$$

Multipliserer (2) med $\sum_i \Delta_{i\alpha}$ og får

$$\sum_{ij} \Delta_{i\alpha} V_{ij} \Delta_{j\beta} = \sum_{ij} \Delta_{i\alpha} \omega_\beta^2 T_{ij} \Delta_{j\beta} \qquad (2')$$

I lign. (1) lar vi først i og j bytte roller, slik at vi betrakter

$$\sum_i V_{ji} \Delta_{i\alpha} = \omega_\alpha^2 \sum_i T_{ji} \Delta_{i\alpha}$$

Pga. symmetri kan vi her la $V_{ji} \to V_{ij}$ og $T_{ji} \to T_{ij}$ før vi endelig multipliserer med $\sum_j \Delta_{j\beta}$:

$$\sum_{ij} \Delta_{i\alpha} V_{ij} \Delta_{j\beta} = \sum_{ij} \Delta_{i\alpha} \omega_\alpha^2 T_{ij} \Delta_{j\beta} \qquad (1')$$

Subtraherer så (2') fra (1'):

$$(\omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2) \sum_{ij} T_{ij} \Delta_{i\alpha} \Delta_{j\beta} = 0$$

Dermed er det umiddelbart opplagt at hvis $\omega_\alpha \neq \omega_\beta$ så blir

$$\sum_{ij} T_{ij} \Delta_{i\alpha} \Delta_{j\beta} = 0$$

Hvis derimot $\alpha = \beta$, blir $(\omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2) = (\omega_\alpha^2 - \omega_\alpha^2) = 0$, mens

$$\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\alpha} \neq 0$$

Slik vi definerte $\Delta_{i\alpha}$, som minoren (i,α) til $|\mathbb{V} - \omega_\alpha^2 \mathbb{T}|$, har vi strengt tatt ikke frihet til å velge en bestemt verdi for $\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\alpha}$. La oss imidlertid "moderere" oss litt og heller si at $\Delta_{i\alpha}$ er proporsjonal med minoren til $|\mathbb{V} - \omega_\alpha^2 \mathbb{T}|$. Vi viste jo på s. 97 at $A_{i\alpha}$ er prop. med minoren, med (kompleks) prop. konst. C_α. Det skulle bli akkurat like bra å sette

$$A_{i\alpha} = C'_\alpha\, \Delta_{i\alpha},$$

nå med nye prop. konst. C'_α, og $\Delta_{i\alpha}$ bare proporsjonal med minoren til $|\mathbb{V} - \omega_\alpha^2 \mathbb{T}|$. Hva er så poenget med dette? Jo, nå har vi frihet til å velge en bestemt verdi for $\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\alpha}$! M.a.o., vi kan fritt velge normeringen av $\Delta_{i\alpha}$.

Ved å velge $\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\alpha} = 1$, kan vi dermed sette:

$$\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\beta} = \delta_{\alpha\beta}$$

Dette ble mye skrik og bare litt ull, men nå er vi i hvert fall i stand til å forenkle T og V på s. 99:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \underbrace{\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\beta}}_{\delta_{\alpha\beta}}\, \dot{\Theta}_\alpha\, \dot{\Theta}_\beta = \frac{1}{2} \sum_\alpha \dot{\Theta}_\alpha^2$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \underbrace{\sum_{ij} T_{ij}\, \Delta_{i\alpha}\, \Delta_{j\beta}}_{\delta_{\alpha\beta}}\, \omega_\beta^2\, \Theta_\alpha\, \Theta_\beta = \frac{1}{2} \sum_\alpha \omega_\alpha^2\, \Theta_\alpha^2$$

Kan da skrive ned Lagrangefunksjonen med normalkoordinatene som uavhengige variable:

$$L = \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\left(\dot{\Theta}_{\alpha}^{2} - \omega_{\alpha}^{2}\Theta_{\alpha}^{2}\right)$$

Lagranges ligninger: $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\Theta}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial \Theta_\alpha} = 0 \qquad \alpha = 1, 2, \dots, n$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\Theta}_\alpha} = \dot{\Theta}_\alpha \,, \quad \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\Theta}_\alpha} = \ddot{\Theta}_\alpha \,, \quad \frac{\partial L}{\partial \Theta_\alpha} = -\omega_\alpha^2 \Theta_\alpha$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\ddot{\Theta}_\alpha + \omega_\alpha^2 \Theta_\alpha = 0} \qquad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

som skulle vises (se s.98) !

Kommentarer:

- Ingen kobling mellom ligningene for ulike normale moder, som derfor kan sies å være ortogonale.
- Ser at def. s.98, $\Theta_\alpha(t) = \mathrm{Re}[C_\alpha e^{-i\omega_\alpha t}]$, er konsistent med beveg.lign. for Θ_α.
- Trenger $2n$ initialbetingelser for å bestemme en fullstendig løsning, dvs. for å fastlegge amplitudene $|C_\alpha|$ og fasene φ_α i integrasjons-konstantene $C_\alpha = |C_\alpha| \exp(i\varphi_\alpha)$.
- Med to eller flere sammenfallende ω_α (dvs. <u>degenerasjon</u>) blir framgangsmåten noe modifisert.

— · —

Ser nå på et par eksempler.

Eks. 1: Partikkel som oscillerer i rommet, påvirket av et potensial $V = \frac{1}{2}(k_1 x^2 + k_2 y^2 + k_3 z^2)$

Kin. energi: $T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$

$$\Rightarrow \quad L = T - V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} (m \dot{x}_i^2 - k_i x_i^2)$$

$\Rightarrow$ Beveg. lign.: $\quad m \ddot{x}_i + k_i x_i = 0 \qquad i = 1,2,3 \qquad$ (ikke sum her!)

Ansats: $x_i = A_i e^{-i\omega t}$

$$\Rightarrow \quad (-m\omega^2 + k_i) A_i = 0 \qquad i = 1,2,3$$

$$\Rightarrow \quad \begin{vmatrix} k_1 - m\omega^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 - m\omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \quad (k_1 - m\omega^2)(k_2 - m\omega^2)(k_3 - m\omega^2) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \omega_1 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{k_2}{m}}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{k_3}{m}}$$

Sammenligning med formalismen på foregående sider:

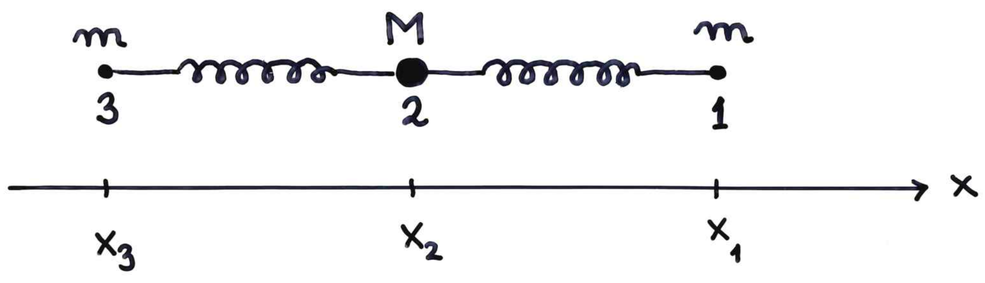
$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{T} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{V} - \omega_\alpha^2 \mathbb{T} = \begin{pmatrix} k_1 - m\omega_\alpha^2 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 - m\omega_\alpha^2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 - m\omega_\alpha^2 \end{pmatrix}$$

De kartesiske koordinatene x_i er i dette eksemplet normalkoord. med beveg. lign. $\quad \ddot{x}_i + \omega_i^2 x_i = 0 \quad ; \quad \omega_i^2 = k_i / m$

Med sentralfelt, $V = V(r)$, blir $k_1 = k_2 = k_3 = k$, dvs. $V = \frac{1}{2} k r^2$. I det tilfellet blir de tre røttene degenererte: $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \sqrt{k/m}$.

Eks. 2: Fri vibrasjoner av lineært symmetrisk treatomig molekyl



Eksempel:

CO_2

$O=C=O$

$-\delta \quad +2\delta \quad -\delta$

Likevektsavstander: $x_{01} - x_{02} = x_{02} - x_{03} = b$

Utsving fra likevekt: $\eta_i = x_i - x_{0i} \quad , \quad i = 1,2,3$

Antar kun nærmeste nabo vekselvirkning samt harmonisk potensial

$$\Rightarrow V = \frac{1}{2}k\left[(x_1-x_2)-b\right]^2 + \frac{1}{2}k\left[(x_2-x_3)-b\right]^2$$

$$= \frac{1}{2}k(\eta_1-\eta_2)^2 + \frac{1}{2}k(\eta_2-\eta_3)^2$$

Kinetisk energi:

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_3^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}_2^2$$

$$= \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2$$

Lagrangefunksjon:

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2 - \frac{1}{2}k(\eta_1-\eta_2)^2 - \frac{1}{2}k(\eta_2-\eta_3)^2$$

Forenkling mulig ved å benytte at bevegelsen av CM er upåvirket av vibrasjoner i molekylet. Anta CM i ro i origo

$$\Rightarrow m(x_1+x_3) + Mx_2 = 0$$

$$\Rightarrow m(\eta_1+\eta_3) + M\eta_2 = 0$$

Definerer nye uavhengige koordinater:

$$Q_a = \eta_1 + \eta_3 \quad , \quad Q_s = \eta_1 - \eta_3$$

$$\Rightarrow \quad \eta_1 = \tfrac{1}{2}(Q_a + Q_s)\,, \quad \eta_3 = \tfrac{1}{2}(Q_a - Q_s)$$

og fra lign. for CM (nederst s. 104): $\eta_2 = -\frac{m}{M}(\eta_1+\eta_3) = -\frac{m}{M} Q_a$

Setter inn i L:

$$L = \tfrac{1}{2}m\cdot\tfrac{1}{4}(\dot{Q}_a+\dot{Q}_s)^2 + \tfrac{1}{2}m\cdot\tfrac{1}{4}(\dot{Q}_a-\dot{Q}_s)^2 + \tfrac{1}{2}M\cdot\frac{m^2}{M^2}\dot{Q}_a^2$$
$$-\tfrac{1}{2}k\left[\tfrac{1}{2}(Q_a+Q_s)+\frac{m}{M}Q_a\right]^2 - \tfrac{1}{2}k\left[-\frac{m}{M}Q_a - \tfrac{1}{2}(Q_a-Q_s)\right]^2$$

$$= \frac{m}{4}\left(1+\frac{2m}{M}\right)\dot{Q}_a^2 + \frac{m}{4}\dot{Q}_s^2 - \tfrac{1}{2}k\left\{\left[\left(\tfrac{1}{2}+\frac{m}{M}\right)Q_a + \tfrac{1}{2}Q_s\right]^2 + \right.$$
$$\left. + \left[\left(\tfrac{1}{2}+\frac{m}{M}\right)Q_a - \tfrac{1}{2}Q_s\right]^2\right\}$$

Ser at leddene $\sim Q_a\cdot Q_s$ kansellerer. Innfører $\mu = M+2m$, dvs. molekylets totale masse. Dermed er $1+2m/M = \mu/M$.
Vi får:

$$L = \frac{m}{4}\frac{\mu}{M}\dot{Q}_a^2 + \frac{m}{4}\dot{Q}_s^2 - \tfrac{1}{2}k\left\{2\cdot\left(\frac{\mu}{2M}\right)^2 Q_a^2 + 2\cdot\left(\tfrac{1}{2}\right)^2 Q_s^2\right\}$$
$$= \frac{m}{4}\left[\dot{Q}_s^2 - \frac{k}{m}Q_s^2 + \frac{\mu}{M}\dot{Q}_a^2 - \frac{k}{m}\frac{\mu^2}{M^2}Q_a^2\right]$$

M.a.o.: Q_a og Q_s er normalkoordinater (se s. 102)

Får L på "standardform" ved å innføre

$$\Theta_s = \sqrt{\frac{m}{2}}\,Q_s \quad , \quad \Theta_a = \sqrt{\frac{m\mu}{2M}}\,Q_a$$

$$\Rightarrow L = \frac{1}{2}\left[\dot{\Theta}_s^2 - \frac{k}{m}\Theta_s^2 + \dot{\Theta}_a^2 - \frac{k\mu}{mM}\Theta_a^2 \right]$$

Samme form som på s. 102, og vi kan umiddelbart skrive ned systemets to egenfrekvenser:

$$\omega_s = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad , \quad \omega_a = \sqrt{\frac{k\mu}{mM}}$$

La oss gå tilbake til $V(\eta_i)$ og $T(\dot{\eta}_i)$ og bestemme egenfrekvensene ved å løse den sekulære ligningen

$$|\mathbb{V} - \omega^2 \mathbb{T}| = 0$$

Her er elementene V_{ij} og T_{ij} i hhv. $\mathbb{V}$ og $\mathbb{T}$ bestemt ved

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3} T_{ij}\,\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j \quad , \quad V = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3} V_{ij}\,\eta_i\eta_j$$

Sammenligning med uttr. for V og T på s. 104 gir

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} k & -k & 0 \\ -k & 2k & -k \\ 0 & -k & k \end{pmatrix} , \quad \mathbb{T} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix}$$

$$|\mathbb{V} - \omega^2\mathbb{T}| = 0$$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} k-\omega^2 m & -k & 0 \\ -k & 2k-\omega^2 M & -k \\ 0 & -k & k-\omega^2 m \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow (k-\omega^2 m)\begin{vmatrix} 2k-\omega^2 M & -k \\ -k & k-\omega^2 m \end{vmatrix} + k \begin{vmatrix} -k & -k \\ 0 & k-\omega^2 m \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow (k-\omega^2 m)\left[(2k-\omega^2 M)(k-\omega^2 m) - k^2\right] + k(-k)(k-\omega^2 m) = 0$$

$$\Rightarrow (k-\omega^2 m)\left(2k^2 - 2km\omega^2 - kM\omega^2 + mM\omega^4 - k^2 - k^2\right) = 0$$

$$\Rightarrow (k-\omega^2 m)\,\omega^2\left(-k\underbrace{(2m+M)}_{\mu} + mM\omega^2\right) = 0$$

$$\Rightarrow \qquad \omega^2 (k-\omega^2 m)(k\mu - \omega^2 mM) = 0$$

Løsninger: $\omega_1 = 0$

$$\omega_2 \equiv \omega_s = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\omega_3 \equiv \omega_a = \sqrt{\frac{k\mu}{mM}}$$

Her hadde vi ikke gjort noen antagelser om CM i ro. Fant da løsningen $\omega_1 = 0$, som tilsvarer uniform translasjon av hele molekylet. Ser at ω_2 og ω_3 er de samme som vi fant ved å uttrykke L på standardform.

[Uten antagelse om CM i ro: $L = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3}\left(\dot{\Theta}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2\Theta_\alpha^2\right)$

Ber. lign. for $\alpha = 1$ $(\omega_1 = 0)$: $\partial L/\partial\dot{\Theta}_1 = \dot{\Theta}_1$, $\partial L/\partial\Theta_1 = 0$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{\Theta}_1} = \ddot{\Theta}_1 = 0 \Rightarrow \dot{\Theta}_1 = \text{konst.}$; $\Theta_1 \sim x_1 + x_2 + x_3$]

Symmetrisk mode: $C^{+2\delta}$ i ro mens de to $O^{-\delta}$ oscillerer i motfase

Antisymm. mode: $C^{+2\delta}$ oscillerer i motfase med de to $O^{-\delta}$

1: $\bullet\!\longrightarrow \qquad \bullet\!\longrightarrow \qquad \longrightarrow$ (transl.)

2: $\longrightarrow \qquad \bullet \qquad \longleftarrow$ (symm.)

3: $\longrightarrow \qquad \longleftarrow\!\bullet \qquad \longrightarrow$ (antisymm.)

Mer om dette i ei øving!